電磁場のゆらぎと久保公式(非平衡系統計力学の基礎研究懇話会-久保セミナー第1回-,研究会報告)

柴田, 文明

しかし，会の実行段階で規模がどんどんと大きくなりまして今日此の会場は一杯になってしまいました。そこで仮にこの会を〝久保セミナー第1回〟と称しますと，第2回以降が有るとすれば，もう少しオープンなものにしなければいけないかなと考えております。先に述べましたような私的な，牧歌的な集まりではおさまらないように思えます。

けれども，表題に掲げましたような基本的な問題に関心を有する研究者が手弁当で集まる会として，出来るものならやっていこうと思います。

そういう訳で今日は若い人達もかなり居られますが，疑問が有れば遠慮なく質問をして下さい。聞くところでは先生も大分やさしくなられたとの由ですので，余り怒ったりはなさらないのではないか。

夕方に懇親会もありますので御参加下さい。以上をもって挨拶と致します。

（柴田文明）

電磁場のゆらぎと久保公式

お茶の水大・理　柴　田　文　明

§0

久保公式というものを考えると，幾つかの疑問や問題点に出会う。その事のあるものはKubo[1]の原論文自身の中でも注意深く考察されている。たとえば難かしいエルゴートの話などは別としても，熱浴というものの影響は $t\to-\infty$ での初期条件として与えられているのみで（カノニカル分布），それ以後の時間発展は熱浴から切り離されているように見える。また系と〝外場〟との相互作用を

$$\mathscr{H}'(t)=-AF(t) \tag{1}$$

と書くが，この場 $F(t)$ は誘電体などの場合は〝内部場〟であるように思える。さらに，van Kampen[2] による批判というようなものもある。この辺の問題は要するにミクロとマクロの関係が問われている。

また $F(t)$ が量子化された場であるときにも久保公式は成立しているであろうか[3]，という事も問われてよい。さらに系の散逸が，最も単純な場合は

$$\omega\chi''(\omega) \tag{2}$$

に比例する，という事を示すにも熱力学の助けを要するであろう。

まだまだ他にも多くの疑問や問題点が存在するかも知れない。しかし，上に述べたことだけでも相当にやっかいな，原理的にも実際上でも解決困難な問題を含んでいる。にもかかわらず，久保公式自身の正しさは疑い得ない。

そこで上述の総てを解決しようと言うのではないが，全く異なる視点から此のような問題を考えてみようと思う[4)]。それは，一言で言えば〝光子のブラウン運動〟という視点からの接近であって，(1)の中では既知の c 数とされている場 $F(t)$ を主役として，系（演算子 A で代表されているが）を脇役にしてしまうのである。したがって，通常のものとは発想が逆になっていて，熱平衡状態にある物質系と光子の場が相互作用するときに，量子化された光子はブラウン運動するであろうが，それはどのようなものであろうか。さらに久保公式とはどのように結びつくであろうか，という問題設定から出発するのである。

§1　現象論

まず現象的に考えてみよう。出発点は Maxwell-Lorentz の式で，電場 $\boldsymbol{e}(\boldsymbol{x}, t)$ と磁場 $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}, t)$ に対して

$$\mathrm{curl}\,\boldsymbol{e} + \frac{1}{c}\dot{\boldsymbol{h}} = 0 \tag{3}$$

$$\mathrm{curl}\,\boldsymbol{h} - \frac{1}{c}\dot{\boldsymbol{e}} = \frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j} \tag{4}$$

である。

j 番目の粒子の持つ電荷を e_j とし，粒子の位置を $R_j(t)$ とすると，(4)の右辺の電流は

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x}, t) = \sum_j e_j \dot{\boldsymbol{R}}_j(t)\,\delta(\boldsymbol{R}_j(t) - \boldsymbol{x}) \tag{5}$$

である。

さて，粒子を二種類に分け，束縛されているものとキャリアとする。その結果 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x}, t)$ は

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x}, t) = \boldsymbol{j}^c(\boldsymbol{x}, t) + \dot{\boldsymbol{\mu}}(\boldsymbol{x}, t) + c\,\mathrm{curl}\,\boldsymbol{m}(\boldsymbol{x}, t) \tag{6}$$

と書かれる。右辺第一項はキャリアによるものであり，第二項は電気能率，第三項は磁気能率に起因する。第二，第三項は一般に多重極展開の形に表わされる。

そこで電磁場に対してクーロン・ゲージをとり，ベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)$ を平面波で展開し，その際の係数を $a_{k\nu}(t)$ および $a^\dagger_{k\nu}(t)$ とする。ν は偏光を区別するサフィクスである。

また我々は電磁場と物質との間の関係－構成方程式として以下のようなものを採用しよう：

$$\mu_k(\omega) = \underline{\alpha}(k, \omega)\, e(k, \omega) + \mathscr{P}(k, \omega) \tag{7}$$

$$m_k(\omega) = \underline{\chi}(k, \omega)\, h(k, \omega) + \mathscr{M}(k, \omega) \tag{8}$$

$$j^c{}_k(\omega) = \underline{\sigma}(k, \omega)\, e(k, \omega) + \mathscr{J}^c(k, \omega) \tag{9}$$

ここで，右辺の第二項はそれぞれの揺ぎの部分である。すなわち電流などを系統的なものと乱雑に変動する部分に分けたのである。

これらの結果を(3), (4)に用いると，$a_{k\nu}(t)$および$a^{\dagger}{}_{-k\nu}(t)$に対する微分方程式が得られ，その係数としてアドミッタンス$\underline{\sigma}(k, \omega)$等があらわれ，さらに揺動項がある，という構造になっている。

§2 （光子に対する）ミクロなランジュバン方程式

前節の現象論と量子論的扱いを接なげるという事を以下で行う。

電磁場と物質系とのミニマルな相互作用というものは

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_{\mathrm{S}} + \sum_j \frac{1}{2m_j}\left[p_j - \frac{e_j}{c}A(R_j)\right]^2 - \sum_j M_j \cdot h(R_j) + \mathscr{H}_{\mathrm{C}} \tag{10}$$

である。あまり説明は要しないと思うがM_jはj番目の粒子のスピンによる磁気モーメントであり，$\mathscr{H}_{\mathrm{s}}$は電磁場のハミルトニアン，$\mathscr{H}_{\mathrm{c}}$は物質系内部の相互作用を表す。

さて，ミクロにランジュバン方程式を導出するには減衰理論というものを用いればよい。一般的な議論はやめて，摂動の２次のオーダーまでの表式を尖鋭化の極限で書き下しておくと，任意の演算子Aに対して

$$\dot{A}(t) = e^{iLt}\, i\,(L_{\mathrm{s}} + \langle L_{\mathrm{sB}}\rangle_{\mathrm{B}})\, A(0)$$

$$+ e^{iLt} \int_0^{\infty} d\tau\, e^{-iL_{\mathrm{s}}\tau} \langle i\, L_{\mathrm{sB}}\, e^{i(L_{\mathrm{s}}+L_{\mathrm{B}})\tau}\, i\, L_{\mathrm{sB}}\rangle_{\mathrm{B}}\, A(0) + K(t) \tag{11}$$

となる。

上の表式で$\langle\cdots\rangle_{\mathrm{B}}$というのは物質系が平衡にあるときの平均操作を表し，sは電磁場，B

は物質系を示している。(11)を用いると，たとえば光子の消滅演算子 $a_{k\nu}(t)$ に対して

$$\dot{a}_{\boldsymbol{k}\nu}(t)=-\mathrm{i}\,\omega_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}\nu}(t)-\sum_{\nu'}\int_0^\infty \mathrm{d}\,\tau<[\hat{f}_{\boldsymbol{k}\nu}(\tau),\ \hat{f}^{+}_{\boldsymbol{k}\nu'}(0)]_{\mathrm{B}}$$

$$\times\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{\boldsymbol{k}}\tau}\,a_{\boldsymbol{k}\nu'}(t)+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{\boldsymbol{k}}\tau}\,a^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\nu'}(t)\}+\hat{f}_{\boldsymbol{k}\nu}(t) \tag{12}$$

という方程式を得る。

すぐに分ることだが，(12)の揺動力 $\hat{f}_{\boldsymbol{k}\nu}(t)$ と $a_{\boldsymbol{k}\nu}(t)$ の減衰項（右辺第二項）との間には，第二種の揺動散逸定理が成り立ち，光子が物質系に叩かれてフラフラとブラウン運動している様を(12)は記述している。この $\hat{f}_{\boldsymbol{k}\nu}(t)$ の形は分っているので，(12)の右辺にあらわれる相関は求めることができ，したがって(12)を前節の結果と比較することにより，様々な輸送係数の表式定まることとなる。

その結果は

$$\underline{\sigma}(\boldsymbol{k},\ \omega)=\frac{1}{h\,\omega V}\int_0^\infty \mathrm{d}\,t\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}<[\hat{j}^{c}_{\boldsymbol{k}}(t),\ \hat{j}^{c}_{-\boldsymbol{k}}(0)]>_{\mathrm{B}}+\sigma_{d}(\omega) \tag{13}$$

のようになる。ここでは書かないが，分極率 $\underline{\alpha}(\boldsymbol{k},\ \omega)$，軌道運動による帯磁率 $\chi(\boldsymbol{k},\ \omega)$，スピン帯磁率 $\underline{\chi}_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{k},\ \omega)$ などの表式が求まるわけである。

これらの結果は Kubo の結果と較べることが出来，本質的に類似の量である。

§3 方程式の解

前節の(12)と，これに対応する $a^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\nu}(t)$ に対する式とが連立しているが，これらの方程式からモーメントが解けて，直線偏光に対しては

$$<a_{\boldsymbol{k}}(t)>=<a_{\boldsymbol{k}}(0)>\mathrm{e}^{-[\mathrm{i}\omega_{\boldsymbol{k}}+\kappa^{(+)}(\boldsymbol{k})]t} \tag{14}$$

のようになる。[5] ここで $\kappa^{(+)}(\boldsymbol{k})$ の実数部および虚数部は，それぞれ

$$\kappa'(\boldsymbol{k})=2\pi\{\sigma'_{xx}(\boldsymbol{k},\ \omega)+\omega\,[\alpha''_{xx}(\boldsymbol{k},\ \omega)+\chi''_{yy}(\boldsymbol{k},\ \omega)$$

$$+\chi''_{\mathrm{s},\,yy}(\boldsymbol{k},\ \omega)]\} \tag{15}$$

$$\kappa''(\boldsymbol{k})=2\pi\{\sigma''_{xx}(\boldsymbol{k},\ \omega)-\omega\,[\alpha'_{xx}(\boldsymbol{k},\ \omega)+\chi'_{yy}(\boldsymbol{k},\ \omega)$$

$$+\chi'_{\mathrm{s},\,yy}(\boldsymbol{k},\ \omega)]\} \tag{16}$$

のように求まり，たとえばスピン帯磁率の虚数部 χ_s'' に ω を掛けたものが吸収をあらわす［(2)式！］という事が(14), (15)から直ちに分るだろう。(16)は勿論，分散を与えるのである。

同様の事は円偏光についても行うことができて，[6] 施光性とかファラディー効果とかの出発点の表式を，何の不定性をも伴うことなく書き下すことができる。

§4．まとめ

以上のような訳であるから，序に述べた問題点のうちの幾つかは解け，幾つかは依然として残ったのであろう。線形応答理論と一口に言うけれども，このように観ることもできるのである。フォトンがブラウン運動をする，と言えば何やら奇妙に聞えるであろうが，有用な視点であると思う。興味を持たれた方は文献を挙げておいたので，詳細は参照されよ。

参考文献

1) R. Kubo: J. Phys. Soc. Jpn. **12** (1957) 570.
2) N. G. van Kampen: Phys. Norv. **5** (1971) 279.
3) Y. Toyozawa: 物性論研究 [2] **5** (1959) 319.
4) N. Hashitsume and F. Shibata: Prog. Theor. Phys. Suppl. No. 69 (1980) 55.
5) F. Shibata, Y. Hamano and N. Hashitsume: J. Phys. Soc. Jpn. **50** (1981) 2166.
6) F. Shibata, Y. Hamano and N. Hashitsume: ibid., 2822.

非線型応答理論とエントロピー生成

阪大・工　一柳正和

§1．非線形応答理論

50年代に線形応答理論[1]が確立され，揺動散逸定理が完結してから30年を経過した。一方，非線型不可逆過程は，Prigogineの変分原理によって解析することができた。統計力学の立場から，Prigogineの変分原理を基礎づけることはまだ完成していないように思われる。この意味で，Kubo理論を非線型応答まで含めるように発展さすことは興味あることにちがいない。van Kampenの批判にある程度答える上でも，非線型応答の理論を展開する必要があるように思われる。

非線型応答理論の要点[2]は，次の通りである。外力 $V(t)$ の作用している物理系の密度行列